- Transformações canônicas

As equações de Lagrange são invariantes sob uma transformação geral de coordenadas, isso é, sua forma permanece a mesma. Na formulação Hamiltoniana, coordenadas e momentos são independentes, o que aumenta muito as escolhas possíveis. Em particular, podemos fazer escolhas meticulosas que simplifiquem a solução do problema

- Exemplo: Suponha que todas as coordenadas q_i sejam cíclicas, H não depende de q_i. Desse modo, temos que ($H \equiv H(p)$)

$$\dot{p}_i = 0 \Rightarrow p_i = \alpha_i = \text{constante}$$

Se H é conservado temos

$$\frac{dH}{dt} = \frac{\partial H}{\partial t} = 0,$$

e escrevemos $H = H(\alpha_1, \dots, \alpha_n)$. Daí

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial \alpha_i} \equiv \omega_i(\alpha) \Rightarrow q_i = \omega_i t + \phi_i$$

Todas as coordenadas são lineares em t e o movimento é muito simples

De maneira geral, buscamos transformações de variáveis no espaço de fase: (2)

$$Q_i \equiv Q_i(q,p,t) \quad e \quad P_i = P_i(q,p,t),$$

onde

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad e \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}, \; i = 1, 2, \ldots, n$$

De maneira geral, nem todas as transformações preservam a forma das equações do movimento.

A transformação é dita canônica se existe uma nova Hamiltoniana

$$K = K(Q, P, t), \text{ tal que}$$

$$\dot{Q}_i = \frac{\partial K}{\partial P_i} \quad e \quad \dot{P}_i = -\frac{\partial K}{\partial Q_i}, \; i = 1, 2, \ldots, n$$

O princípio de Hamilton pode ser escrito

- $$\delta \int_{t_1}^{t_2} \left\{ \sum_{i=1}^{n} p_i \dot{q}_i - H(p,q,t) \right\} dt = 0,$$
- $$\delta \int_{t_1}^{t_2} \left\{ \sum_{i=1}^{n} P_i \dot{Q}_i - K(P,Q,t) \right\} dt = 0,$$

Uma condição suficiente para a validade comum das equações é que

$$\sum_{i=1}^{n} p_i \dot{q}_i - H = \sum_{i=1}^{n} P_i \dot{Q}_i - K + \frac{dF}{dt}, \quad \text{pois}$$

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} \frac{dF}{dt}\, dt = \delta \Big[F(q(t_2), p(t_2), t_2) - F(q(t_1), p(t_1), 0) \Big]$$

$$= 0 .$$

- $\delta F(q(t_2), p(t_2), t_2) = \sum_i \frac{\partial F}{\partial q_i} \cancelto{0}{\delta q_i(t_2)} + \frac{\partial F}{\partial p_i} \cancelto{0}{\delta p_i(t_2)}$
- Análogo para t_1

Sempre consideraremos que a transformação $Q_i = Q_i(p,q,t)$ e $P_i = P_i(p,q,t)$ sejam inversíveis. F depende de uma misturas das variáveis novas e velhas e é conhecida como <u>função geradora</u>

Há quatro casos importantes

1. $F = F_1(q, Q, t)$, com q_i e Q_i independentes

$$\sum_i p_i \dot{q}_i - H = P_i \dot{Q}_i - K + \frac{dF_1}{dt} = P_i \dot{Q}_i - K + \frac{\partial F_1}{\partial t} + \frac{\partial F_1}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial F_1}{\partial Q_i} \dot{Q}_i$$

Essa equação é satisfeita se

$\bullet\ p_i = \dfrac{\partial F_1}{\partial q_i}$; $P_i = -\dfrac{\partial F_1}{\partial Q_i}$, $K(Q,P,t) = H(q,p,t) + \dfrac{\partial F_1}{\partial t}$

Exemplo: $F_1 = qQ$

$$p = \frac{\partial F_1}{\partial q} = Q \quad e \quad P = -\frac{\partial F_1}{\partial Q} = -q ,$$

e temos que as coordenadas e momentos podem ser convertidos um no outro, pois são equivalentes no formalismo Hamiltoniano

2. $F = F_2(q, P, t) - \sum_i Q_i P_i$

Coordenadas antigas q_i e novos momentos P_i como variáveis independentes.

$$\sum_i p_i \dot{q}_i - H = \cancel{\sum_i P_i \dot{Q}_i} - K + \frac{dF_2}{dt} - \cancel{\sum_i \dot{Q}_i P_i} - \sum_i Q_i \dot{P}_i$$

$$= -K - \sum_i Q_i \dot{P}_i + \frac{\partial F_2}{\partial t} + \sum_i \left[\frac{\partial F_2}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial F_2}{\partial P_i} \dot{P}_i \right]$$

o que nos dá

$$p_i = \frac{\partial F_2}{\partial q_i} ; \quad Q_i = \frac{\partial F_2}{\partial P_i} \quad e \quad K = H + \frac{\partial F_2}{\partial t}$$

Se considerarmos $F_2 = \sum_i q_i P_i$ temos a transformação identidade

3. $F = F_3(p, Q, t) + \sum_i q_i p_i$

p_i e Q_i são as variáveis independentes

$$q_i = -\frac{\partial F_3}{\partial p_i} \; ; \; P_i = -\frac{\partial F_3}{\partial Q_i} \; ; \; K = H + \frac{\partial F_3}{\partial t}$$

4. $F = F_4(p, P, t) + \sum_i q_i p_i - \sum_i Q_i P_i$

p_i e P_i variáveis independentes

$$q_i = -\frac{\partial F_4}{\partial p_i} \; ; \; Q_i = \frac{\partial F_4}{\partial P_i} \; ; \; K = H + \frac{\partial F_4}{\partial t}$$

Essas funções geratrizes, F_1, F_2, F_3 e F_4, formam as quatro maneiras fundamentais de se produzir transformações canônicas. Essa nomeclatura foi introduzida por Goldstein e se tornou tradicional.

Seguindo nossa motivação inicial, buscamos agora uma transformação $(q, p) \rightarrow (Q, P)$ tal que $K \equiv K(P)$ para o oscilador harmônico

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 q^2}{2} \qquad p = f(P)\cos Q$$
$$q = \frac{f(P)}{m\omega}\sin Q$$

(6)

e temos assim:

$$K = \frac{1}{2m} f^2(P)$$

Se agora fazemos $p/q = \frac{f(P)\cos Q}{\frac{f(P)}{m\omega}\sin Q} = m\omega \cot Q$

Isso nos inspira a procurar uma função geratriz do tipo $F_1 \equiv F_1(q,Q)$:

$$\begin{cases} p = \frac{\partial F_1}{\partial q} = m\omega q \cot Q \Rightarrow F_1 = \frac{m\omega q^2}{2}\cot Q \\ P = -\frac{\partial F_1}{\partial Q} = \frac{m\omega^2 q^2}{2} \frac{1}{\operatorname{sen}^2 Q} \end{cases}$$

Dessas equações obtemos que

$$q = \sqrt{\frac{2P}{m\omega}} \sin Q \quad e \quad p = \sqrt{2Pm\omega}\cos Q$$

$$\Rightarrow f(P) = \sqrt{2Pm\omega} \quad e \quad K = \omega P = E \Rightarrow P = E/\omega = cte$$

Temos então que $Q = \omega t + Q_0$ e também

$$q = \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}} \sin(\omega t + Q_0) \; ; \; p = \sqrt{2mE} \sin(\omega t + Q_0)$$

- Formulação simplética

Definiremos agora o colchete ou parêntese de Poisson:

$$\{u, v\} = \sum_{K=1}^{n} \left(\frac{\partial u}{\partial q_K} \frac{\partial v}{\partial p_K} - \frac{\partial v}{\partial q_K} \frac{\partial u}{\partial p_K} \right)$$

É fácil verificarmos as seguintes relações fundamentais:

$$\{q_i, q_j\} = \{p_i, p_j\} = 0 \quad \text{e} \quad \{q_i, p_j\} = \delta_{ij} \, ,$$

lembrando que p e q são independentes

Teorema: Uma transformação $Q_j = Q_j(q, p, t)$ e $P_j = P_j(q, p, t)$ é canônica se e somente se

$$\{Q_i, Q_j\} = \{P_i, P_j\} = 0 \quad \text{e} \quad \{Q_i, P_j\} = \delta_{ij}$$

Vamos usar a notação apresentada na lista 1 para provar o teorema:

$$\vec{\eta} = \begin{pmatrix} q_1 \\ \vdots \\ q_n \\ p_1 \\ \vdots \\ p_n \end{pmatrix}, \quad \tilde{J} = \begin{bmatrix} 0_{n\times n} & \mathbb{1}_{n\times n} \\ -\mathbb{1}_{n\times n} & 0_{n\times n} \end{bmatrix}, \quad \nabla_\eta = \begin{pmatrix} \partial/\partial q_1 \\ \vdots \\ \partial/\partial q_n \\ \partial/\partial p_1 \\ \vdots \\ \partial/\partial p_n \end{pmatrix}$$

$\tilde{J}^T \tilde{J} = \tilde{J} J^T = \mathbb{1}$ e

$\tilde{J}^2 = -\mathbb{1}$

As equações de Hamilton ficam

$$\boxed{\dot{\vec{\eta}} = \tilde{J} \cdot \nabla_\eta H}$$

Embora o teorema seja geral, faremos a prova apenas no caso independente do tempo $\Rightarrow K = H$.

$$Q_i = Q_i(q,p) \quad \text{e} \quad P_i = P_i(q,p)$$

$$\vec{\beta} = \begin{pmatrix} Q_1 \\ \vdots \\ Q_n \\ P_1 \\ \vdots \\ P_n \end{pmatrix}, \quad \text{com } \vec{\beta} = \vec{\beta}(\vec{\eta})$$

Tome agora a derivada temporal de $\vec{\beta}$:

$$\dot{\beta}_i = \sum_j \frac{\partial \beta_i}{\partial \eta_j} \dot{\eta}_j \Rightarrow \dot{\vec{\beta}} = \tilde{M} \cdot \dot{\vec{\eta}}, \quad M_{ij} \equiv \frac{\partial \beta_i}{\partial \eta_j}$$

$M_{ij} \rightarrow$ Jacobiano da transformação

Nós queremos mostrar que:

$\dot{\vec{\beta}} = \tilde{J} \cdot \nabla_\beta H$ para uma transformação canônica

Voltando para a derivada temporal de $\vec{\beta}$:

$$\dot{\beta}_i = \sum_{j,k} \frac{\partial \beta_i}{\partial \eta_j} \underbrace{J_{jk} \frac{\partial H}{\partial \eta_k}}_{\dot{\eta}_j} = \sum_{j,k,l} \underbrace{\frac{\partial \beta_i}{\partial \eta_j}}_{M_{ij}} J_{jk} \underbrace{\frac{\partial \beta_l}{\partial \eta_k}}_{M_{lk}} \frac{\partial H}{\partial \beta_l},$$

$\dot{\vec{\beta}} = \tilde{M} \cdot \tilde{J} \cdot \tilde{M}^T \cdot \nabla_\beta H$ e temos assim

que a transformação é canônica se:

$$\boxed{\tilde{M} \cdot \tilde{J} \cdot \tilde{M}^T = \tilde{J}} \to \text{condição simplética}$$

Considere agora o parêntese de Poisson:

$\{u, v\} = (\nabla_\eta u)^T \cdot \tilde{J} \cdot (\nabla_\eta v)$, donde

$\{\eta_i, \eta_j\} = J_{ij}$, em notação matricial

Temos então que:

$$\{\beta_i, \beta_j\} = \sum_{kl} \overbrace{\frac{\partial \beta_i}{\partial \eta_k}}^{= M_{ik}} J_{kl} \overbrace{\frac{\partial \beta_j}{\partial \eta_l}}^{= M_{jl}} = (\tilde{M} \cdot \tilde{J} \cdot \tilde{M}^T)_{ij}$$

Ou seja, a condição para o teorema valer é a mesma que para recuperarmos o parêntese de Poisson:

$$\tilde{M} \cdot \tilde{J} \cdot \tilde{M}^T = \tilde{J}$$

—//—

$$\{u, v\} = \sum_i \left[\frac{\partial u}{\partial q_i} \frac{\partial v}{\partial p_i} - \frac{\partial v}{\partial q_i} \frac{\partial u}{\partial p_i} \right] = \sum_{kl} \frac{\partial u}{\partial \eta_k} J_{kl} \frac{\partial v}{\partial \eta_l}$$

$$= (\nabla_\eta u)^T \cdot \tilde{J} \cdot (\nabla_\eta v)$$

– Parênteses de Poisson

Vamos agora explorar algumas propriedades do parênteses de Poisson. Seja $F(q,p,t)$ então

$$\frac{dF}{dt} = \sum_{k=1}^{n}\left(\frac{\partial F}{\partial q_k}\dot{q}_k + \frac{\partial F}{\partial p_k}\dot{p}_k\right) + \frac{\partial F}{\partial t}$$

$$= \sum_{k=1}^{n}\left(\frac{\partial F}{\partial q_k}\frac{\partial H}{\partial p_k} - \frac{\partial F}{\partial p_k}\frac{\partial H}{\partial q_k}\right) + \frac{\partial F}{\partial t}$$

$$= \{F, H\} + \partial F/\partial t$$

Em particular:

$$\dot{q}_i = \{q_i, \mathcal{H}\} \; ; \; \dot{p}_i = \{p_i, H\},$$

Eqs. de Hamilton em termos dos parênteses de Poisson.

Naturalmente, os parênteses de Poisson é invariante sob transformações canônicas, ou seja ele é independente do conjunto de variáveis canônicas escolhidas para descrever a dinâmica

$$\{u, v\} = \sum_{k=1}^{n}\left(\frac{\partial u}{\partial q_k}\frac{\partial v}{\partial p_k} - \frac{\partial v}{\partial q_k}\frac{\partial u}{\partial p_k}\right) = \sum_{kl}\frac{\partial u}{\partial \eta_k}J_{kl}\frac{\partial v}{\partial \eta_l}$$

$$\{u,v\} = \sum_{\substack{kl\\ ij}} \frac{\partial u}{\partial \beta_i} \overbrace{\frac{\partial \beta_i}{\partial \eta_k}}^{=M_{ik}} J_{kl} \frac{\partial v}{\partial \beta_j} \overbrace{\frac{\partial \beta_j}{\partial \eta_l}}^{=M_{jl}}$$

$$= \sum_{ij} \frac{\partial u}{\partial \beta_i} \underbrace{\left[\tilde{M} \cdot \tilde{J} \cdot \tilde{M}^T\right]_{ij}}_{=\tilde{J}\text{, se canônica}} \frac{\partial v}{\partial \beta_j}$$

$$= \sum_{ij} \frac{\partial u}{\partial \beta_i} J_{ij} \frac{\partial v}{\partial \beta_j} = \{u,v\} \,!$$

Os parênteses de Poisson gozam das seguintes propriedades algébricas:

1) Anti-simetria: $\{A,B\} = -\{B,A\}$, donde $\{A,A\}=0$

2) Linearidade: $\{A+\alpha B, C\} = \{A,C\} + \alpha \{B,C\}$

3) $\{AB,C\} = A\{B,C\} + \{A,C\}B$;

$\{A,BC\} = \{A,B\}C + B\{A,C\}$

4) Identidade de Jacobi: $\{\{A,B\},C\} +$
$\{\{B,C\},A\} + \{\{C,A\},B\} = 0$

Exceto a identidade de Jacobi, as demais propriedades são de imediata demonstração e ficam como exercício.

- Transformações canônicas infinitesimais

Considere agora a seguinte função geradora

$$F_2(q,P,t) = \sum_k q_k P_K + \varepsilon G(p,P,t), \quad \text{onde}$$

$\sum_k q_K P_K$ é a identidade e $\underline{\varepsilon << 1}$.

Das propriedades de F_2 temos

- $$p_i = \frac{\partial F_2}{\partial q_i} = P_i + \varepsilon \frac{\partial G}{\partial q_i} \Rightarrow \delta p_i = P_i - p_i = -\varepsilon \frac{\partial G}{\partial q_i}$$
- $$Q_i = \frac{\partial F_2}{\partial P_i} = q_i + \varepsilon \frac{\partial G}{\partial P_i} = q_i + \varepsilon \frac{\partial G}{\partial p_i}\left[1 + \varepsilon \frac{\partial G}{\partial P_i \partial q_i}\right]$$

$$= q_i + \varepsilon \frac{\partial G}{\partial p_i} + O(\varepsilon^2)$$

$$\Rightarrow \delta q_i = Q_i - q_i = \varepsilon \frac{\partial G}{\partial p_i}$$

Em termos dos parênteses de Poisson:

$$\delta q_i = \varepsilon \{q_i, G\} \ ; \ \delta p_i = \varepsilon \{p_i, G\}$$

Em notação simplética:

$$\delta \vec{\eta} = \varepsilon \{\vec{\eta}, G\}$$

- Exemplo: se $G = p_j$, temos que

$\delta q_i = \varepsilon \{q_i, p_j\} = \varepsilon \delta_{ij} \Rightarrow$ momento é o gerador de translações espaciais.

Evolução temporal como transformação canônica

Considere uma transformação infinitesimal com $G = H$ e $\varepsilon = dt$

$$\delta q_i = dt\,\{q_i, H\} = \dot{q}_i\,dt\,,\quad \delta p_i = dt\,\{p_i, H\} = \dot{p}_i\,dt$$

Daí temos que

$$Q_i(t) = q_i(t) + \delta q_i(t) = q_i(t) + \dot{q}_i(t)\,dt = q_i(t+dt)$$

$$P_i(t) = p_i(t) + \delta p_i(t) = p_i(t) + \dot{p}_i(t)\,dt = p_i(t+dt)$$

A transformação canônica gerada por H leva os valores do q's e do p's de t até $t+dt$. A Hamiltoniana é a geradora da evolução temporal.

Se adotarmos agora um ponto de vista ativo da transformação, podemos vê-la como levando (q,p) ao novo ponto $(q+\delta q, p+\delta p)$ do mesmo espaço de fase. Se combinarmos então um número infinito de transformações infinitesimais podemos então encontrar a evolução temporal em um intervalo finito.

$$F = F_2 - \sum_K Q_K P_K = \sum_K P_K q_K - \sum_K Q_K P_K + dt\,H$$

$$= -\sum_K P_K\,\delta q_K + dt\,H = \Big(-\sum_K \underbrace{p_K\,\dot{q}_K + H}_{=-L}\Big)dt + O(dt^2)$$

A evolução temporal em um intervalo finito:

$$F = -\int_{t_0}^{t} L\, dt = -S$$

O negativo da ação gera uma transformação canônica que evolui o estado do sistema entre t_0 e t. Ou seja a ação S evolui de frente para trás no tempo.

No caso de uma variável dinâmica genérica $u(q,p,t)$ temos que sua variação infinitesimal é

$$\delta u = u(q+\delta q, p+\delta p, t) - u(q,p,t)$$

$$= \sum_i \left(\frac{\partial u}{\partial q_i} \delta q_i + \frac{\partial u}{\partial p_i} \delta p_i \right) = \varepsilon \sum_i \left(\frac{\partial u}{\partial q_i} \frac{\partial G}{\partial p_i} - \frac{\partial u}{\partial p_i} \frac{\partial G}{\partial q_i} \right)$$

$$= \varepsilon \{u, G\}$$

Considere agora o caso especial $u = \{E, F\}$, onde $E(q,p,t)$ e $F(q,p,t)$ são duas variáveis dinâmicas quaisquer. Daí

$$\delta\{E,F\} = \varepsilon \{\{E,F\}, G\} \quad (*)$$

Como o parêntese de Poisson independe das variáveis canônicas utilizadas para o seu cálculo, sua variação deve-se exclusivamente às variações de E e F, de modo que

$$\delta\{E,F\} = \{\delta E, F\} + \{E, \delta F\}$$
$$= \varepsilon\left[\{\{E,G\},F\} + \{E,\{F,G\}\}\right]$$

Comparando essa equação com (*), temos a identidade de Jacobi

$$\{\{E,F\},G\} + \{\{G,E\},F\} + \{\{F,G\},E\} = 0$$

Essa prova elegante é apresentada no livro do Nivaldo.

- Constantes de Movimento e Teorema de Poisson

Tome agora $u = H$ e suponha que G não dependa explicitamente do tempo. Neste caso

$$\delta H = \varepsilon\{H,G\} = -\varepsilon\frac{dG}{dt}$$

Desse modo se H é invariante ($\delta H = 0$) sob uma transformação canônica infinitesimal, sua função geradora é uma constante do movimento

- Exemplo: Suponha que H não dependa de q_K. Logo $\delta H = 0$ se $Q_i = q_i + \varepsilon\delta_{iK}$. Nesse caso, $G = p_K$ e temos que p_K = constante, que é nosso resultado já conhecido da dinâmica Hamiltoniana

- Teorema de Poisson: O parêntese de Poisson de duas constantes de movimento é também uma constante de movimento

Sejam F e G constantes de movimento:

$$\frac{dF}{dt} = \{F, H\} + \frac{\partial F}{\partial t} = 0 \quad \text{e} \quad \frac{dG}{dt} = \{G, H\} + \frac{\partial G}{\partial t} = 0$$

Desse modo,

$$\frac{d}{dt}\{F, G\} = \{\{F,G\}, H\} + \frac{\partial}{\partial t}\{F, G\}$$

$$= \{\{F,G\}, H\} + \left\{\frac{\partial F}{\partial t}, G\right\} + \left\{F, \frac{\partial G}{\partial t}\right\}$$

$$= \{\{F,G\}, H\} + \{\{H,F\}, G\} + \{F, \{H,G\}\}$$

$= 0$, pela identidade de Jacobi

- Solução formal das equações de movimento

Seja $u = u(q,p)$ uma variável dinâmica independente do tempo:

$$\left(\frac{du}{dt}\right)_{t=0} = \{u, H\}_{t=0} \equiv \{u, H\}_0$$

$$\left(\frac{d^2u}{dt^2}\right)_{t=0} = \left(\frac{d}{dt}\{u, H\}\right)_{t=0} = \{\{u, H\}, H\}_0$$

A generalização desse resultado é óbvia e dá (17)

$$\left(\frac{d^n u}{dt^n}\right)_{t=0} = \{\cdots\{\{u, H\}, H\}, \cdots H\}_0$$

Temos então que:

$$u = u_0 + t\left(\frac{du}{dt}\right)_0 + \frac{t^2}{2}\left(\frac{d^2u}{dt^2}\right)_0 + \frac{t^3}{3!}\left(\frac{d^3u}{dt^3}\right)_0 + \cdots$$

$$= u_0 + t\{u, H\}_0 + \frac{t^2}{2}\{\{u, H\}, H\} + \frac{t^3}{3!}\{\{\{u, H\}, H\}, H\} + \cdots$$

Essa a solução formal de movimento para u. Na prática ela é pouco útil se envolve o cálculo de um número grande de termos

– Exemplo: Partícula sujeita a uma força constante F com $H = p^2/2m - Fx$.

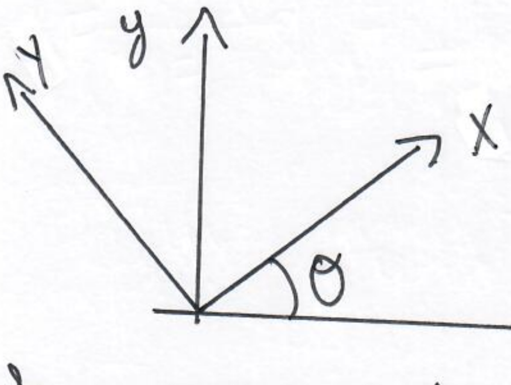
- $\{x, H\} = \frac{\partial x}{\partial x}\frac{\partial H}{\partial p} - \frac{\partial x}{\partial p}\frac{\partial H}{\partial x} = p/m$
- $\{\{x, H\}, H\} = \frac{1}{m}\{p, H\} = F/m$

Como $F = cte$, os demais parênteses de Poisson são nulos e temos que:

$x(t) = x_0 + \frac{p_0}{m}t + \frac{t^2}{2}\frac{F}{m}$, que é a solução elementar bem conhecida.

- Parênteses de Poisson do Momento Angular

Considere uma rotação ao redor do eixo-z



$$X = x\cos\theta - y \,\mathrm{sen}\,\theta$$
$$Y = x\,\mathrm{sen}\,\theta + y\cos\theta$$
$$Z = z$$

Se agora considerarmos um ângulo infinitesimal $\delta\theta$

$$\delta x = X - x = -y\,\delta\theta \;;\; \delta y = Y - y = x\,\delta\theta \;;\; \delta z = 0$$

É então imediato que (exercício)

$$\delta x = \delta\theta\,\{x, J_z\}, \quad J_z = x p_y - y p_x$$
$$\delta y = \delta\theta\,\{y, J_z\} \quad \text{(Momento angular ao longo de } z\text{)}$$
$$\delta z = \delta\theta\,\{z, J_z\}$$

Ou seja, o momento angular é o gerador de rotações.

Para uma rotação em torno de uma direção definida pelo vetor unitário $\hat{n}$ temos

$$\delta\vec{F} = \delta\theta\,\{\vec{F}, \vec{J}\cdot\hat{n}\}$$, $\vec{F}$ é um vetor arbitrário.

– Teorema de Liouville

Seja R uma região do espaço de fase (q,p) que é mapeada na região R' do espaço de fase (Q,P) por meio de uma transformação canônica

$$\Omega = \int_R dq_1 \cdots dq_n \, dp_1 \cdots dp_n \equiv \int_R d^{2n}\eta$$

$$\Omega' = \int_{R'} dQ_1 \cdots dQ_n \, dP_1 \cdots dP_n \equiv \int_{R'} d^{2n}\beta$$

Podemos agora realizar uma troca de variáveis

$$\Omega' = \int_{R'} d^{2n}\beta = \int_R \overset{=|\det M|}{\left|\frac{\partial(\beta_1,\ldots,\beta_{2n})}{\partial(\eta_1,\ldots,\eta_{2n})}\right|} d^{2n}\eta \,,$$

Mas o Jacobiano dessa transformação nada mais é que a matriz M introduzida anteriormente

$$M_{ij} = \frac{\partial \beta_i}{\partial \eta_j} .$$

Como a transformação é canônica, ela satisfaz a condição simplética

$$\tilde{M}\cdot\tilde{J}\cdot\tilde{M}^T = \tilde{J} \Rightarrow \det(\tilde{M}\cdot\tilde{J}\cdot\tilde{M}^T) = \overset{1}{\cancel{\det\tilde{J}}}$$

$$\det(\tilde{M})\,\overset{=\det\tilde{M}}{\det(\tilde{M}^T)}\,\overset{1}{\cancel{\det(\tilde{J})}} = 1$$

$$(\det\tilde{M})^2 \Rightarrow \det\tilde{M} = \pm 1$$

Temos assim que

$$\Omega' = \int_R \underbrace{|\det M|}_{1} \, d^{2n}\beta = \Omega$$

$\Rightarrow$ o volume de qualquer região do espaço de fase é invariante sob transformações canônicas.

Se R_0 é a região em t_0 e R_t a região em t obtida levando cada ponto de R_0 no ponto correspondente R_t por meio da evolução temporal gerada por H então 

$$\Omega_t = \Omega_0 \,,$$ pois a evolução temporal é uma transformação canônica

Esse é o teorema de Liouville.

Como devemos nesse volume do espaço de fase. O que ele significa? Podemos considerar um ensemble (ou coleção) de sistemas com uma função densidade $\rho(p,q,t)$:

- $\rho(p,q,t)$ pode representar a probabilidade que parametriza nossa ignorância quando temos um único sistema mas não conhecemos bem o seu estado:

$$\int \rho(p,q,t) \prod_i dp_i dq_i = 1$$

- Temos um grande número N de sistemas idênticos não interagentes ($N = 10^{23}$ moléculas de gás em um recipiente) e só estamos interessados no comportamento médio:

$$\int \rho(p,q,t) \underbrace{\prod_i dp_i dq_i}_{= d\Omega} = N$$

Nesse caso, sabemos que o número de partículas no espaço de fase não é criado nem destruído:

$$d/dt \int \rho \, d\Omega = d/dt \, N = 0$$

$$\int \left[\frac{d\rho}{dt} d\Omega + \rho \cancelto{0}{\frac{d\Omega}{dt}} \right] = 0$$

0, pelo teorema de Liouville

$$\Rightarrow \frac{d\rho}{dt} = 0$$, que reescrevemos como

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \{\rho, H\} = 0$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \{H, \rho\} = \sum_K \left[\frac{\partial H}{\partial q_K}\frac{\partial \rho}{\partial p_K} - \frac{\partial H}{\partial p_K}\frac{\partial \rho}{\partial q_K} \right],$$

que é conhecida como equação de Liouville.

Em física, estamos muitas vezes interessados em distribuições de probabilidade estacionárias:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \quad (\text{estacionário})$$

O exemplo mais famoso é a distribuição de Boltzmann:

$$\rho = \underbrace{\frac{1}{Z}}_{\text{normalização}} e^{-\frac{H(q,p)}{K_B T}}$$

Para uma partícula livre, temos $H = \vec{p}^{\,2}/2m$ e

$$\rho = \frac{1}{Z} e^{-\frac{m\dot{\vec{r}}^{\,2}}{2K_B T}},$$ distribuição Gaussiana de velocidades (Maxwell)

Para uma partícula livre em um campo magnético: $H = (\vec{p} - q\vec{A})^2/2m$, mas $\dot{\vec{r}} = \frac{1}{m}(\vec{p} - q\vec{A})$ e temos novamente:

$$\rho = \frac{1}{Z} e^{\frac{-m\dot{\vec{r}}^{\,2}}{2K_B T}} \; !$$

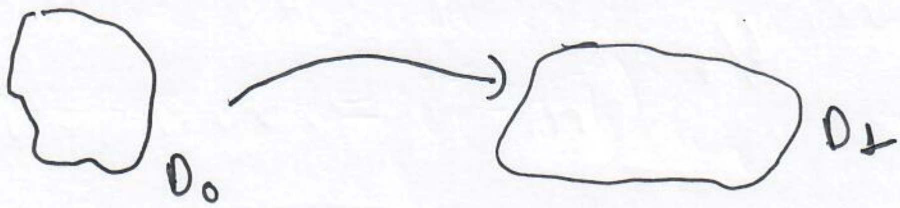
Paradoxo de Bohr-van Leeuwen: não existe magnetismo na física clássica.

– Teorema da recorrência de Poincaré

Esse teorema se aplica a sistemas com um espaço de fase limitado, ou de volume finito. Essa não é uma situação incomum. Se a energia é conservada $E = T + V$ então devemos ter $V(\vec{r}) \leq E$ o que limita o espaço de fase.

Teorema: Considere um ponto inicial P no espaço de fase. Então para qualquer vizinhança D_0 de P existe um ponto $P' \in D_0$ que irá retornar a D_0 em um tempo finito

Demonstração (de física): Considere a evolução de D_0 sobre um intervalo de tempo finito τ. As equações de Hamilton nos dão então um mapa $D_0 \to D_1$



Pelo teorema de Liouville sabemos que os volumes dessas regiões não mudam

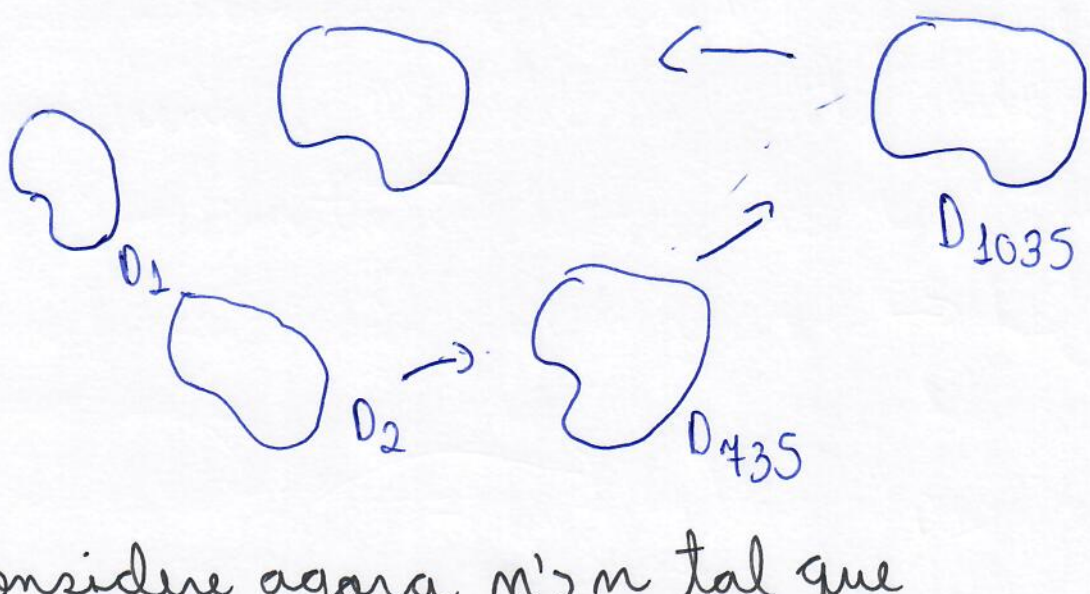
$$\Omega(D_0) = \Omega(D_1) \quad \text{(Liouville)}$$

Seja D_n a região após um tempo nT, com n sendo um inteiro. Portanto, devemos ter inteiros n e n' tal que a intersecção de D_n e $D_{n'}$ não é vazia:

$$D_n \cap D_{n'} \neq \emptyset .$$

Isso deve ser verdade porque se não o for, por sucessivas aplicações do mapa seríamos capazes de gerar um volume infinito do espaço de fase

$$\bigcup_{n=0}^{\infty} D_n \to \infty \quad \text{(viola hipótese)}$$



Considere agora $n' > n$ tal que

$$\omega_{n,n'} = D_n \cap D_{n'} \neq \emptyset$$

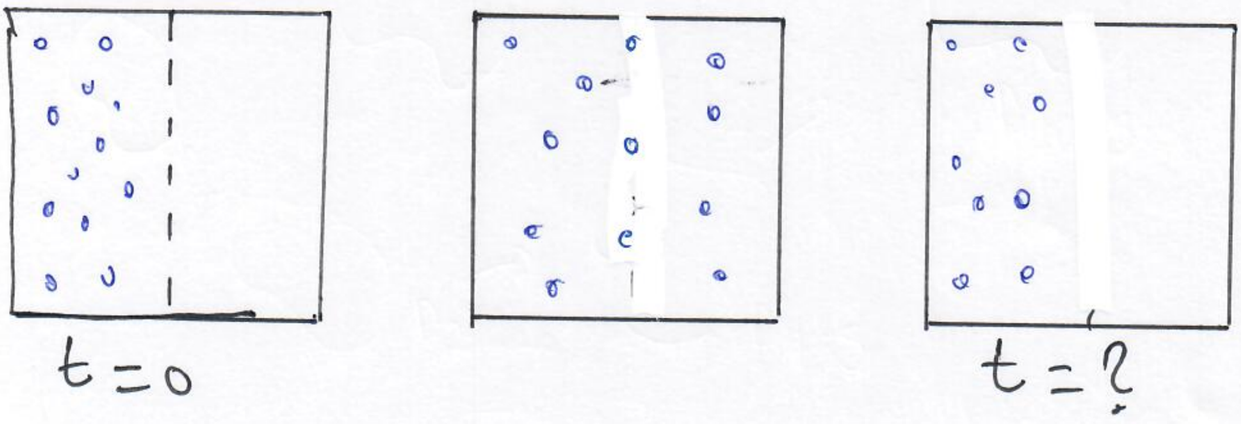
Como podemos inverter esse mapa Hamiltoniano, podemos voltar no tempo e encontrar ⇒ regredimos as duas regiões

$$D_{-n}\,\omega_{n,n'} = D_{-n}D_n \cap D_{-n}D_{n'} \neq \emptyset$$

$$\omega_{0,\,n'-n} = D_0 \cap D_{n'-n} \neq \emptyset$$

Desse modo, algum ponto $P' \in D_0$ retornou a D_0 após um número $n'-n$ de passos de tempo T

O que esse teorema quer dizer. Considere a seguinte situação



Ou seja, em um tempo finito, todas as moléculas do gás voltam a ocupar um lado da caixa.

Como fica a Segunda Lei da Termodinâmica?

O truque aqui é que esse tempo é muito maior que a idade do Universo!

Podemos fazer uma estimativa simples. Para um gás em uma câmara cúbica de lado L temos:

$$\mathcal{H} = \sum_{n=1}^{N} \left(p_{i,x}^2 + p_{i,y}^2 + p_{i,z}^2 \right)/2m = E$$

Essa equação define uma esfera no espaço 3N dimensional e o volume do espaço de fase é

$$V(\Omega) = \underbrace{\int \prod_i dq_i}_{L^{3N}} \underbrace{\int \prod_i dp_i}_{V_{esfera}^{3N}} = L^{3N} V_{esfera}^{3N}$$

Inicialmente, temos todas as partículas ocupando metade do cubo e assim

$$V(\Omega_0) = L^{2N} \left(L/2 \right)^N \cdot V_{esfera}^{3N}$$

Desse modo (pensem no volume como probabilidade)

$$\frac{V(\Omega)}{V(\Omega_0)} = 2^N = 10^{N \log_{10} 2} \simeq 10^{10^{22}} \quad \text{para } N = 10^{23}$$

Se multiplicarmos essa razão por qualquer escala de tempo microscópica razoável vemos que as moléculas nunca irão voltar para apenas um lado em nosso Universo.